

УДК 539.120.61:535.326

## ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ В РАМКАХ МЕТОДА МАТРИЦ ПЕРЕНОСА И МЕТОДА ПЛОСКИХ ВОЛН

*Р.Х. Гайнутдинов, Е.В. Зайцева, В.А. Токарева, М.А. Хамадеев*

### Аннотация

Исследована проблема расчета дисперсионных соотношений для фотонных кристаллов. Рассмотрена возможность использования при этом метода матриц переноса и метода плоских волн. Показано, что методы, которые ранее использовались для получения зонных диаграмм, применимы и для расчета дисперсионных соотношений.

**Ключевые слова:** фотонные кристаллы, дисперсионные соотношения, зонные диаграммы.

---

### Введение

Исследование фотонных кристаллов на сегодняшний день представляет собой весьма актуальную задачу. Широкий спектр практических приложений обусловлен необычными оптическими свойствами фотонных кристаллов [1, 2]. Это связано с тем, что характерный размер ячейки фотонного кристалла порядка длины волны видимого излучения. При таких условиях в спектрах пропускания подобных сред (которые иногда называют периодическими фотонными структурами [3]) появляются спектральные области, в пределах которых распространение света в подавлено во всех или в некоторых избранных направлениях. Помимо массы практических приложений активно исследуется квантовая электродинамика (КЭД) атомов, находящихся в фотонных кристаллах, поскольку появляется возможность контролировать спонтанное излучение находящихся в них атомов [4]. Это открывает путь к созданию низкопороговых лазерных излучателей для видимого и ближнего инфракрасного диапазонов.

Ключевой особенностью фотонных кристаллов является отличие дисперсионных соотношений для фотона от случая вакуума. Под дисперсионными соотношениями в фотонных кристаллах понимается связь энергии фотона  $\omega$  с его импульсом  $\mathbf{k}$  (здесь и далее используется естественная система единиц  $\hbar = c = 1$ , в которой энергия фотона тождественна равна его частоте, а импульс – волновому вектору). Для исследования запрещенных зон обычно пользуются приведенными зонными схемами или дисперсионными диаграммами (зонными диаграммами), в которых как одномерные, так и многомерные дисперсионные зависимости располагают на плоском рисунке путем перебора значений координат волнового вектора вдоль траектории, ограничивающей неприводимую зону Бриллюэна. При этом все энергетические зоны размещены в первой зоне Бриллюэна. Эта процедура полностью заимствована из физики твердого тела [5]. Это, конечно, лишает нас наглядности при исследовании поведения дисперсионных соотношений, соответствующего большим энергиям. Подобное ограничение является существенным недостатком дисперсионных диаграмм, потому что получаемые данные не дают полной

информации об исследуемой структуре. Такой проблемы не возникает при непосредственном анализе самих дисперсионных соотношений, а потому их использование является более целесообразным при решении различного рода теоретических задач, поскольку в КЭД часто приходится сталкиваться с интегрированием выражений, содержащих энергию фотона  $\omega$ , по импульсу  $\mathbf{k}$  до больших значений. На языке зонных схем [5] дисперсионные соотношения представляют собой расширенную зонную схему. Хотя такая схема не очень удобна для анализа запрещенных зон в фотонном кристалле, она позволяет адекватно отразить дисперсионные свойства фотона при больших энергиях. Авторы ранних работ концентрировали свое внимание на влиянии запрещенных зон при низких энергиях и поэтому использовали упрощенные модели дисперсионных соотношений (в частности, приближение эффективной массы [3, 4]), которые корректно описывали поведение дисперсии на границе запрещенных зон, однако при больших энергиях давали нефизичные решения, что, в частности, сказывалось на сходимости интегралов. В работе [6] впервые было сделано замечание, что учет больших энергий может иметь значение при расчете КЭД величин. Там же были приведены дисперсионные соотношения в одномерном случае в виде расширенной схемы. Однако непосредственное получение и использование дисперсионных соотношений в такой форме для решения КЭД задач в литературе не встречаются. В связи с этим целью настоящей статьи является исследование возможности получения дисперсионных соотношений для разных фотонных кристаллов в рамках современных методов, используемых для анализа зонных диаграмм.

## 1. Дисперсионные диаграммы и дисперсионные соотношения

Однозначные ответы на вопросы о том, какой вид имеет электромагнитная волна в фотонном кристалле и чем она отличается от таковой в однородных средах, можно получить, решив уравнения Максвелла для периодической среды. Однако, как это известно из физики твердого тела, импульс частицы, волновая функция которой в периодической среде описывается функцией Блоха, определен с точностью до вектора  $\mathbf{g}$  – произвольного вектора обратной решетки [5]. Поэтому всегда возможно, а часто и удобно, выбрать импульс  $\mathbf{k}$ , стоящий в индексе функции Блоха, так, чтобы конец его оказывался лежащим внутри первой зоны Бриллюэна. Процедура приведения произвольного вектора  $\mathbf{k}$  к первой зоне Бриллюэна и получила название *схемы приведенных зон*. Такой вариант зонной схемы удобен тем, что здесь наличие или отсутствие полных запрещенных зон проявляется автоматически. Особенно это преимущество актуально для двух- и трехмерных фотонных кристаллов, поскольку для них решение задачи сильно усложняется. И если дисперсионные диаграммы для двумерных кристаллов еще можно привести в виде поверхностей, то для трехмерных кристаллов зонные диаграммы – единственный способ сколь-нибудь наглядно изобразить дисперсию графически. Для этого ограничиваются значениями лишь вдоль границы неприводимой зоны.

Однако когда нас интересует зависимость энергии фотона от его импульса, очевидно, приведенная схема не подходит. При бесконечно малом оптическом контрасте дисперсионные соотношения будут представлять собой прямую  $\omega = k/n$ , что соответствует *расширенной зонной схеме*, в которой различные энергетические зоны размещены в импульсном пространстве в различных зонах Бриллюэна. Поэтому естественно считать, что связь энергии с импульсом физически отражена лучше в виде расширенной схемы. Кроме того, если в какой-нибудь зоне разложить блоховское решение в ряд, нетрудно показать, что наибольшую энергию переносит компонента, соответствующая текущей зоне Бриллюэна.

Существенным параметром, полностью определяющим характер численного расчета дисперсионных соотношений, является их размерность. Чем больше размерность, тем более сложной является задача. Знание точного трехмерного решения для реальных кристаллов дает максимально полную информацию о свойствах излучения в среде, в связи с чем решение одномерных задач может показаться неактуальным. Однако для ряда проблем такая информативность может быть избыточна в ущерб простоте расчета, поэтому в подобных случаях применяются более простые модели, опирающиеся на одномерный случай. Речь идет, например, об использовании изотропных дисперсионных соотношений [4] или псевдоодномерной модели фотонного кристалла [7].

## 2. Дисперсионные соотношения для одномерных фотонных кристаллов

Для решения одномерных задач прекрасно подходит метод матриц переноса [1, 2, 8], в рамках которого поле и элементы фотонного кристалла представляются в виде столбцов и операторов. Рассматривается падение плоской линейно-поляризованной волны  $E_0^+ \exp[i(k_0^w r - \omega t)]$  на многослойную среду, состоящую из  $N$  слоев с чередующимися показателями преломления. Чтобы учесть обе поляризации света, поле в кристалле рассматривается как четырехкомпонентный вектор

$$E_j = \begin{pmatrix} E_{1j}^+ \\ E_{1j}^- \\ E_{2j}^+ \\ E_{2j}^- \end{pmatrix},$$

где  $j$  обозначает номер слоя, знак « $\pm$ » – направление распространения, а индексы 1 и 2 – направление поляризации волны. Поля в точках  $z_j$  и  $z_j + \zeta$  внутри  $j$ -го слоя связаны матрицей распространения  $\Phi_j$  соотношением

$$E_j(z_j + \zeta) = \Phi_j(\zeta) \cdot E_j(z_j),$$

где

$$\Phi_j = \begin{pmatrix} \exp(2i\pi n_j d_j / \lambda) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-2i\pi n_j d_j / \lambda) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(2i\pi n_j d_j / \lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(-2i\pi n_j d_j / \lambda) \end{pmatrix}.$$

На границе слоя изменение волны описывается соответствующей матрицей  $M_{ij}$  в виде:

$$E_i(z_{ij} + 0) = M_{ij} \cdot E_j(z_{ij} - 0),$$

где

$$M_{ij} = \begin{pmatrix} 1/t_{ij} & r_{ij}/t_{ij} & 0 & 0 \\ r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/t_{ij} & r_{ij}/t_{ij} \\ 0 & 0 & r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij} \end{pmatrix},$$

$t_{ij}$  и  $r_{ij}$  – коэффициенты Френеля для отражения и прохождения поля, падающего из  $i$ -го слоя, через  $ij$ -ю границу раздела. Тогда полная матрица распространения через многослойную среду имеет вид:

$$T = M_{(N+1)N} \Phi_N \cdots M_{10},$$

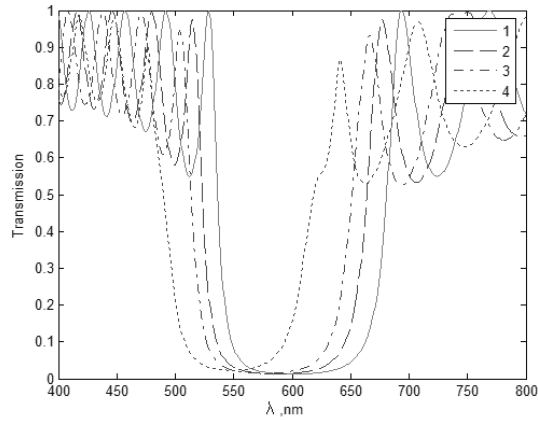


Рис. 1. Спектры пропускания фотонного кристалла, состоящего из 7 оптических ячеек. Каждая из ячеек состоит из материалов с  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 1.5$  и толщинами слоев  $d_1 = 75$  нм,  $d_2 = 100$  нм. Спектры рассчитаны для различных значений углов падения света  $\theta = 0, \pi/8, \pi/6, \pi/4$  (1, 2, 3, 4 соответственно)

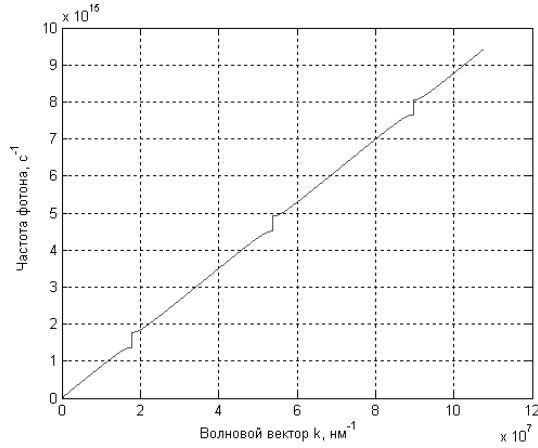


Рис. 2. Дисперсионные соотношения для фотонного кристалла, состоящего из материалов с  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 1.5$  и толщинами слоев  $d_1 = 75$  нм,  $d_2 = 100$  нм при нормальном падении света

где  $\Phi_m = \Phi_m(d_m)$ . Соответствующий коэффициент пропускания многослойной среды запишется в виде

$$t = \frac{t_1^2 + t_2^2}{2},$$

где

$$t_1 = \left| \frac{T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21}}{T_{22}} \right|, \quad t_2 = \left| \frac{T_{33}T_{44} - T_{34}T_{44}}{T_{44}} \right|.$$

С помощью метода матриц переноса можно построить спектр пропускания одномерного фотонного кристалла при заданных значениях количества оптических слоев, их показателей преломления и толщины, а также для различных углов падения света на кристалл (рис. 1). Дисперсионные соотношения для плоской волны, распространяющейся внутри одномерного фотонного кристалла под

углам  $\theta$  к оси  $z$ , состоящего из чередующихся слоев толщиной  $a$  и  $b$  и с диэлектрическими проницаемостями  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ , получаются из уравнения на собственные значения для матриц  $M$  и имеют вид [2]:

$$\cos(k_z d) = \cos(k_1 a) \cdot \cos(k_2 b) - \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}} + \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \right) \cdot \sin(k_1 a) \cdot \sin(k_2 b),$$

где  $k_i = \sqrt{\varepsilon_i \omega^2 - k_x^2}$ ,  $k_x$  – проекция волнового вектора на плоскость слоев, сохраняющаяся при прохождении волны через границы раздела слоев,  $d = a + b$  – период фотонного кристалла. Данное тождество при непосредственном вычислении приводит к приведенной зонной схеме. Чтобы получить расширенную зонную схему, требуется аккуратно производить сдвиг и отражение решения для каждой зоны. Это связано с периодическими особенностями тригонометрических функций. Для случая нормального падения результат приведен на рис. 2. С помощью метода матриц переноса можно получить дисперсионные соотношения для сколь угодно больших значений энергий для одномерных кристаллов с любыми параметрами.

### 3. Дисперсионные соотношения для многомерных фотонных кристаллов

В случае, когда размерность дисперсионных соотношений больше единицы, получить выражение в аналитическом виде не удастся. Численные расчеты проводятся с помощью метода разложения собственных функций по плоским волнам [1, 2]. Этот метод основан на разложении диэлектрической проницаемости среды, являющейся для фотонного кристалла периодической функцией координат и пространственно-периодической части электромагнитного поля, в ряд Фурье (хотя в зависимости от симметрии задачи может быть использован другой базис). Решение уравнений Максвелла, таким образом, представляется в виде суммы плоских волн с соответствующими коэффициентами. Дисперсионные соотношения получаются из системы уравнений для этих коэффициентов. Результаты расчетов для двумерного случая наглядно представимы в виде трехмерного графика поверхности (рис. 3), где по оси  $z$  отложены значения частоты, по осям  $x$  и  $y$  – значения компонент волнового вектора. Для получения корректных результатов здесь так же, как и в одномерном случае, необходимо аккуратно сдвигать и отражать поверхности, соответствующие разным ветвям решений. В результате двумерные дисперсионные соотношения будут графически представлять конус с разрезами, соответствующими полным и неполным запрещенным зонам.

Данный способ представления результатов является очень наглядным и хорошо реализуемым для двумерных фотонных кристаллов с различной топологией. Он позволяет сопоставить значения волнового вектора и энергии в форме разрывной функции, что дает возможность использовать полученную зависимость при дальнейших исследованиях свойств фотонных кристаллов. Кроме того, полученные дисперсионные соотношения легко привести и к общепринятому виду дисперсионных диаграмм (рис. 4), удобных при изучении запрещенных зон в фотонных кристаллах.

На рис. 3 представлен график дисперсионных соотношений только для нескольких первых зон. Для получения результатов в области больших энергий требуется проводить расчеты с учетом соответствующих компонент решений. Кроме того, точность воспроизведения особенностей графика на границе неприводимой зоны Бриллюэна зависит от числа учтенных компонент (на рис. 3 представлен наиболее простой четырехкомпонентный случай). Переход к трехмерному случаю характеризуется количественным усложнением задачи и тем, что в задачах о зонной структуре трехмерных фотонных кристаллов, состоящих, например, из сфер, существенно лучшую точность дает метод разложения по сферическим волнам, поскольку

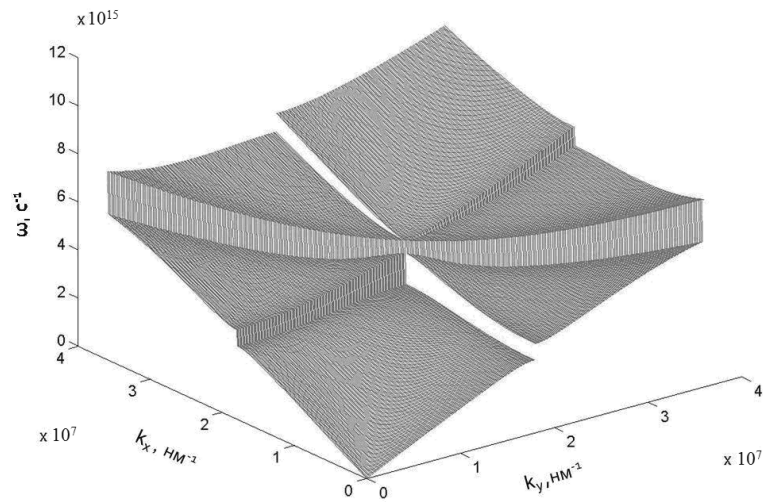


Рис. 3. Дисперсионные соотношения для двумерного фотонного кристалла, состоящего из квадратных столбцов шириной  $h = 100$  нм с  $\varepsilon_1 = 4$ , находящихся в среде с  $\varepsilon_1 = 2, 25$ , расстояние между столбцами  $H = 75$  нм, ТЕ-поляризация

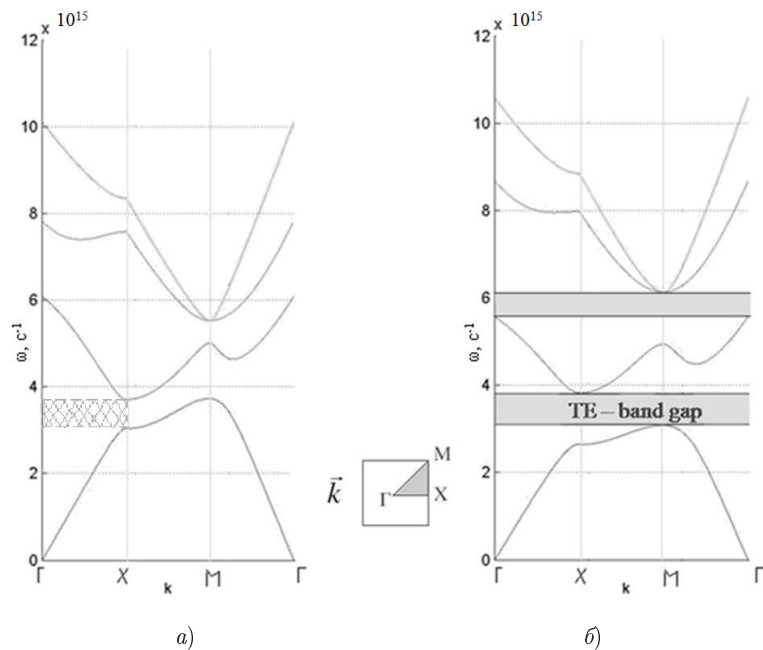


Рис. 4. Дисперсионные диаграммы для двумерного фотонного кристалла с  $h = 100$  нм,  $H = 75$  нм при различном оптическом контрасте: а) 1.33; б) 1.6. При увеличении оптического контраста возникает полная фотонная запрещенная зона

такой базис является более естественным для кристаллов данной конфигурации. Однако сам алгоритм расчета остается таким же, с той лишь разницей, что не удастся сколь-нибудь наглядно представить дисперсионные соотношения графически, как это делается в двумерном случае, кроме как с помощью приведенных зонных схем.

### Заключение

Показано, что дисперсионные соотношения имеют ряд преимуществ по сравнению с дисперсионными диаграммами, связанных с адекватным отражением зависимости энергии фотона от его импульса в условиях фотонных кристаллов. И это имеет существенное значение при решении КЭД задач. Показано также, что современные методы получения зонных диаграмм применимы для получения дисперсионных соотношений с той лишь разницей, что в последнем случае требуется проводить определенные изменения в непосредственном решении, опирающиеся, однако, на физические предположения.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ НШ-5289.2010.2 и Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (ГК № 02.740.11.0428).

### Summary

*R.Kh. Gainutdinov, E.V. Zaitseva, V.A. Tokareva, M.A. Khamadeev.* Dispersion Relations for Photonic Crystals within the Transfer Matrix Method and the Plane Wave Method.

The problem of the calculation of dispersion relations for photonic crystals is investigated. The use of the transfer matrix method and the plane wave method for solving this problem is proposed. It is shown that these methods, which were earlier used for obtaining the energy band diagrams, are applicable for calculating the dispersion relations as well.

**Key words:** photonic crystal, dispersion relations, band diagrams.

### Литература

1. *Joannopoulos J.D., Johnson S.G., Winn J.N., Meade R.D.* Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. – Princeton: Princeton Univ. Press, 2008. – 305 p.
2. *Skorobogatiy M., Yang J.* Fundamentals of Photonic Crystal Guiding. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2009. – 280 p.
3. *John S., Wang J.* Quantum Electrodynamics near a Photonic Band Gap: Photonic Bound States and Dressed Atom // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 64. – P. 2418–2421.
4. *John S., Wang J.* Quantum optics of localized light in a photonic band gap // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 43. – P. 12772–12789.
5. *Куттель Ч.* Введение в физику твердого тела. – М: Наука, 1978. – 792 с.
6. *Li Z.-Y., Xia Y.* Quantum optics of localized light in a photonic band gap // *Phys. Rev. B.* – 2001. – V. 63. – P. 121305(R)-1–121305(R)-4.
7. *Барышев А.В. и др.* Оптическая характеристика синтетических опалов // *Физ. тверд. тела.* – 2002. – Т. 44. – С. 1573–1581.
8. *Eghlidi M.H., Mehrany K., Rashidian B.* Improved differential-transfer-matrix method for inhomogeneous one-dimensional photonic crystals // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2006. – V. 23. – P. 1451–1459.

Поступила в редакцию  
29.01.10

---

Гайнутдинов Ренат Хамитович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики и нанофотоники Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: *Renat.Gainutdinov@ksu.ru*

**Зайцева Екатерина Владимировна** – магистрант кафедры оптики и нанофотоники Казанского (Приволжского) федерального университета.

**Токарева Виктория Александровна** – магистрант кафедры оптики и нанофотоники Казанского (Приволжского) федерального университета.

**Хамадеев Марат Актасович** – аспирант кафедры оптики и нанофотоники Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: *Marat.Khamadeev@ksu.ru*